# 제3장 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식 - 1차원 문제

## 3.1 하밀토니안의 고유상태와 정상상태

슈뢰딩거 방정식이 시간과 공간 부분이 분리된 변수분리 형태의 해를 갖는 경우를 생각해 보자: $\Psi(x,t) = \Phi(x)\Omega(t)$ .
하밀토니안이 시간에 대하여 직접적으로 의존하지 않을 때, 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$i\hbar \frac{d\Omega(t)}{dt}\,\Phi(x) = H\Phi(x)\,\Omega(t)\,.$$

여기서 $H\Phi(x)$ 는 오로지 $x$ 만의 함수로 주어지므로, 양변을 $\Phi(x)\Omega(t)$ 로 나누어 주면,
위 식은 다음과 같아진다.

$$i\hbar \frac{d\Omega(t)}{dt}/\Omega(t) = H\Phi(x)/\Phi(x)$$

위 식의 우변과 좌변이 각각 $x$ 와 $t$ 만의 함수이므로 이 식이 성립하려면 우변과 좌변이 동일한 상수가 되어야 한다. 이 상수를 $E$ 라고 놓으면 슈뢰딩거 방정식은 다음의 두 방정식으로 표현된다.

$$i\hbar \frac{d\Omega(t)}{dt} = E\,\Omega(t)\,,$$

$$H\Phi(x) = E\,\Phi(x)\,.$$

첫 번째 방정식의 해는 $\Omega(t) = \Omega_0 \exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ 의 형태로 주어지며, 두 번째 방정식은 시간과 무관하며, 함수 $\Phi(x)$ 가 고유값이 $E$ 인 하밀토니안 $H$ 의 고유함수(eigen function) 임을 보여준다. 이처럼 시간과 무관한 두 번째 방정식을 우리는 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식(time independent Schrödinger equation)이라고 부르며, 양자역학에서 대부분의 문제는 이러한 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식의 해를 구하는 것으로 귀착된다. 여기서 한 가지 더 주목할 점은 상수 $E$가 하밀토니안 $H$ 의 고유값이라는 점이다. 하밀토니안은 에너지를 나타내는 물리량에 해당하므로, 2장에서 언급한 바와 같이 하밀토니안은 자기수반 연산자인 에르미트 연산자가 되어야 하며, 그 고유값 $E$ 는 실수로서 주어진 물리계의 측정된 에너지를 의미한다. 그리고 이때 에너지가 $E$로 측정된 이 물리계의 상태는 파동함수(wave function)가 $\Phi(x)$ 로 주어지는 하밀토니안 $H$ 의 고유상태에 있게 된다. 이상은 다음과 같이 바꾸어 표현할 수도 있다.
어떤 물리계가 하밀토니안의 고유상태에 있을 때 그 계의 상태를 나타내는 파동함수는 다음과 같이 주어진다.

$$\Psi(x,t) = \Phi(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)\,.$$

여기서 $E$ 는 상수로 그 계의 에너지인 하밀토니안 $H$ 의 고유값이며, $\Phi(x)$ 는 그에 해당하는 고유함수이다. 즉, $H\Phi(x) = E\Phi(x)$ 를 만족한다.
이상은 시간에 의존하는 함수가 하밀토니안의 고유함수라고 가정하더라도 쉽게 보일 수 있

다. 즉, $H\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)$ , $E$가 상수이면 슈뢰딩거 방정식은 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)$ 로 쓸 수 있으므로, 우리는 $\Psi(x,t)=\phi(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ , $\phi(x)$ 는 임의의 $x$ 함수로 쓸 수 있다. 이를 다시 원래 방정식 $H\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)$ 에 집어넣으면, 하밀토니안 연산자 $H$가 $t$ 에 의존하지 않고 $t$ 에 작용하지도 않으므로, $H\phi(x)=E\phi(x)$ 가 되어 $\phi(x)$가 결국 위에서 언급하였던 고유함수 $\Phi(x)$ 와 동등함을 보여준다.
이와 같은 하밀토니안의 고유상태를 우리는 정상상태(stationary state)라 부르는데, 이는 직접적인 시간의존도가 없는 물리적 관측가능량($A$)의 하밀토니안 고유상태($\Psi$)에 대한 기댓값을 구해보면 그 이유를 알 수 있다.

$$< A > \; = \; < \Psi \mid A \mid \Psi >$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(x,t)\, A\, \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi^*(x)\, e^{\frac{i}{\hbar}Et} A\, \Phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi^*(x)\, A\, \Phi(x)$$

즉, 시간에 직접적으로 의존하지 않는 어떠한 관측가능량 $A$도 $\frac{d}{dt} < A > \; = 0$ 이 되어 그 기댓값이 시간에 따라 변하지 않으므로, 우리는 이러한 하밀토니안의 고유상태를 정상상태라고 부른다.
그렇다면 하밀토니안의 고유상태가 아닌 경우에는 상태함수의 시간변화가 어떻게 주어질까? 이에 대한 답은 하밀토니안의 고유함수들이 임의의 파동함수를 기술할 수 있는 기저함수들(basis functions)을 이룬다는데 있다. 하밀토니안의 고유함수들이 $H\Phi_n(x)=E_n\Phi_n(x)$ 으로 주어지고, 어떤 특정한 시간($t=t_0$)에 그 상태를 기술하는 파동함수($\phi(x)$)를 알게 되었다면, $\Psi(x,t_0)=\phi(x)$, 우리는 파동함수 $\phi(x)$ 를 고유함수 $\Phi_n$ 들의 선형결합으로 표현할 수 있다: $\phi(x)=\sum_n c_n \Phi_n(x)$ ,  $c_n \in \mathbb{C}$ 인 상수.
여기에서 다음과 같이 주어지는 파동함수가 슈뢰딩거 방정식을 만족함을 알 수 있다.

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)]\Phi_n(x)$$

즉,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \sum_n c_n E_n \exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)]\Phi_n(x)$$

$$= \sum_n c_n \exp[-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)]\, H\,\Phi_n(x)$$

$$= H\,\Psi(x,t)$$

로 되어 시간에 의존하는 슈뢰딩거 방정식을 만족한다.

• 자유입자의 평면파 해

슈뢰딩거 방정식의 해 중에서 가장 간단한 자유입자의 해에 대해서 생각해 보자. 여기서 자유입자는 위치에너지가 없어서 전혀 구속이 없는 경우를 가정한다. 이 경우 하밀토니안은 운동에너지만 있게 되어 $H=\dfrac{p^2}{2m}$ 로 간단하게 주어진다. 그러므로 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같다: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi$ .

여기서 $\dfrac{2mE}{\hbar^2}\equiv k^2$ 로 놓으면, 그 해는 $\exp(\pm ikx)$로 주어진다. 즉, $\psi_k(x)=N\exp(ikx)$로 쓸 수 있다. 여기서 $N$은 적절한 규격화 상수이고, $k$는 음과 양의 모든 범위를 포함하는데, 규격화에 대해서는 잠시 후에 고려하기로 하겠다. 이러한 자유입자 해는 운동량 $p$의 고유해가 됨을 곧 알 수 있다.

$$p\,\psi_k(x)=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(N exp(ikx))=\hbar k N exp(ikx)=\hbar k\,\psi_k(x)$$

그러므로 운동량 연산자의 고유값은 $\hbar k$ 로 주어짐을 알 수 있다.

통상 파동함수의 규격화는 전체 영역에서 확률의 합이 1이 되도록 하여야 하지만, 자유입자 해의 경우 무한대에서도 영이 되지 않으므로 다른 방식을 취하여야 한다. 이를 위해서 우리는 다음과 같이 디락의 델타함수를 도입하여 규격화 조건을 준다.

$$<\psi_{k'}|\psi_k>\;=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\psi_{k'}{}^*(x)\psi_k(x)=\delta(k-k')$$

여기서 디락의 델타함수에 대해서 잠시 알아보기로 하자.

델타함수는 다음과 같이 정의된다.

$$\delta(x-x')\begin{cases}=0 & \text{for } x\neq x'\\ \neq 0 & \text{for } x=x'\end{cases}\;,\quad \int_{-\infty}^{\infty}dx\,\delta(x-x')=1\,,\quad \int_{-\infty}^{\infty}dx\,f(x)\,\delta(x-x')=f(x')\,.$$

그리고 다음과 같은 적분 표현으로 나타낼 수도 있다.

$$\delta(x-x')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,\exp[ik(x-x')]\,.$$

위의 자유입자 파동함수의 규격화 조건식에 이러한 델타함수의 적분 표현을 적용하면,

$$<\psi_{k'}|\psi_k>\;=\;|N|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\exp(-ik'x)\exp(ikx)=\;|N|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\exp[ix(k-k')]$$

우리는 규격화 상수 $N$ 이 $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$ 가 되어야 함을 알 수 있으므로 자유입자에 대한 슈뢰딩거 방정식의 해는 다음과 같다:

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(ikx)\,.$$

여기서 주의할 점은 자유입자 파동함수는 무한히 퍼져있으므로 그 크기(norm)가 무한 값이 된다는 것이다: $\|\psi_k\|\;=\;<\psi_k\,|\,\psi_k>\;=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-ikx)\exp(ikx)\;=\;\infty$ .

이러한 특징은 연속적인 고유값을 가지며 무한히 퍼져있는 진동하는 파동함수들에서 나타나는 일반적인 현상으로 우리는 이러한 경우에 통상 델타함수로 규격화를 하게 된다. 우리는 이러한 자유입자 파동함수가 평면파와 같다하여 평면파 해(plane wave solution)라고 부른다. 그 이유는 이러한 하밀토니안 고유함수는 정상상태가 되어 다음과 같이 표현되기 때문이다.

$$\psi_k(x,t) = \psi_k(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(ikx - iwt) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp[ik(x-vt)] \ .$$

여기서 $w \equiv \frac{E}{\hbar}$ , $v \equiv \frac{w}{k}$ 로 정의되었으며, 위 함수는 $+x$ 방향으로 $v$의 속도로 움직이는 평면파동을 나타내기 때문이다.

▸ 푸리에 변환과 디락 델타함수의 적분표현 ◂

푸리에 변환은 함수들을 주기함수들로 분해하는데 자주 쓰이며 통상 다음과 같이 정의된다.

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\ g(k)\exp(ikx)$$

이의 역변환은 다음과 같이 주어진다. (참고: 아프켄의 수리물리학)

$$g(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x)\exp(-ikx)$$

이상의 관계를 적용하고, 디락 델타함수의 정의를 쓰면 우리는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x)\delta(x-k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp(-ikx)f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp(-ikx)\int_{-\infty}^{\infty} dk'\, g(k')\exp(ik'x)$$

여기서 $x \to t$, $k' \to x$ 로 바꾸어주면, 위식은 다음과 같이 쓰여 진다.

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \frac{\exp(-ikt)}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ g(x)\exp(ixt) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x)\int_{-\infty}^{\infty} dt\,\frac{1}{2\pi}\exp(-ikt + ixt).$$

위 두 식을 비교하면, 우리는 디락 델타함수가 다음과 같이 주어짐을 알 수 있다.

$$\delta(x-k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\exp[it(x-k)] \ .$$

---